

## ИДЕНТИФИКАЦИЯ И СУБОПТИМИЗАЦИЯ ДЕЙСТВУЮЩИХ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Кац М.Д., Давиденко А.М.

Рубежанский химико-технологический институт Восточно-украинского национального университета им. В. Даля, [kats@is.ua](mailto:kats@is.ua).

Известно, что большинство действующих производств в химии, металлургии, нефтепереработке, биотехнологии и других отраслях промышленности работают не в оптимальных режимах и имеют существенные резервы повышения эффективности работы по экономическим, потребительским, экологическим критериям и другим критериям. [1].

Низкая эффективность работы большинства действующих производств объясняется в первую очередь ограничениями известных методов идентификации. По литературным данным их использование может быть эффективным, если выходной показатель 1 а число идентифицируемых параметров не более 3.

Для эффективного решения задач совершенствования действующих технологических процессов с практически любым количеством входных параметров и выходных показателей разработан новый метод идентификации изучаемого процесса – метод восстановления одномерных зависимостей (МВОЗ). [2, 3].

С помощью МВОЗ осуществляется редукция изучаемого процесса к его элементарным свойствам – строится математическая модель зависимости выходного показателя  $Y$  от каждого из  $n$  входных параметров  $X_i$  процесса.

Исходная информация для построения модели представляет собой таблицу экспериментального материала, полученную в режиме наблюдения за работой изучаемого процесса. Каждая строка этой таблицы содержит информацию о значениях всех входных параметров и выходных показателей в одной реализации изучаемого процесса. Под реализацией понимается: для периодических процессов одна операция (плавка в мартеновском и конвертерных производствах), для непрерывных процессов – период времени, превышающий время превращения сырья в продукт. Например, в доменной плавке фиксируются среднесуточные значения входных и выходных переменных.

### 1. Алгоритм построения математической модели с помощью МВОЗ:

1. Таблицу исходных данных сортируют по возрастанию входного параметра  $X_1$ .
2. Диапазон вариаций параметра  $X_1$  делится на три поддиапазона из условия попадания в каждый поддиапазон одинакового (примерно одинакового) количества опытов - если число опытов в таблице экспериментального материала не кратно трем или по разные стороны границы находятся одинаковые значения. Границы поддиапазонов определяются как среднее между значениями в последнем опыте предыдущего и первом опыте последующего поддиапазонов.

3. Для каждого поддиапазона значения параметра  $X_1$  определяются средние значения ( $X_{1cpD_1}$ ,  $X_{1cpD_2}$ ,  $X_{1cpD_3}$ ).

4. Определяются средние значения выходного показателя  $Y$  в строках, попавших в каждый из поддиапазонов по  $X_1$  после выполнения пп1,2 ( $Y_{cpD_1}$ ,  $Y_{cpD_2}$ ,  $Y_{cpD_3}$ ).

5. По полученным по пп. 3, 4 координатам трех точек ( $X_{1cpD_1}$ ,  $Y_{cpD_1}$ ;  $X_{1cpD_2}$ ,  $Y_{cpD_2}$ ;  $X_{1cpD_3}$ ,  $Y_{cpD_3}$ ) строят график зависимости выходного показателя от 1-ого входного параметра  $Y=F_1(X_1)$ .

6. Повторяют пп. 1-5 последовательно для каждого из  $n$  входных параметров и получают модель  $Y=F_i(X_i)$ ,  $i=1, n$  (1), описывающую зависимости выходного показателя от каждого из  $n$  входных параметров.

В построении модели  $Y=F_i(X_i)$  участвуют два вектор-столбца таблицы экспериментального материала -  $\{X_i\}$  и  $\{Y\}$ . Однако значение выходного показателя  $Y$  определяется всеми входными параметрами. Если бы зависимость выходного показателя от входного параметра  $X_i$  была слабой, то в каждом поддиапазоне средние значения  $Y$  были бы очень близкими, т.е. зависимость  $Y=F_i(X_i)$  практически не проявилась бы на фоне влияния остальных параметров. При построении модели значения параметра  $X_i$  проранжированы по

возрастанию и усредняются в каждом поддиапазоне, значения же остальных параметров случайным образом «размазаны» по всему диапазону их возможных значений. Это позволяет выделять влияние  $i$ -ого параметра на фоне остальных.

## **2. Метод сверки множества выходных показателей в обобщённый критерий**

В случае, когда выходных показателей более одного, свёртка множества выходных показателей в обобщённый критерий оценки эффективности работы производства осуществляется следующим образом. Для каждого частного выходного показателя  $Y_j$  задаются допустимые ограничения. По некоторым критериям, например, показателям качества продукта, ограничения задаются в технологической документации (регламенте производства).

Обобщённый показатель ( $Y_{об}$ ) принимает значения 1 («хорошо») в тех строках таблицы экспериментального материала, в которых каждый частный выходной показатель  $Y_j$  удовлетворяет заданным ограничениям, и значение 0 («плохо»), если хотя бы один из частных критериев не удовлетворяет заданным ограничениям.

## **3. Анализ математической модели**

### **3.1. Качественный анализ зависимостей (1).**

При изучении реальных технологических процессов возможны 4 вида зависимостей  $Y=F_i(X_i)$ : монотонно убывающая (с увеличением значения параметра  $X_i$  значение выходного показателя уменьшаются), монотонно возрастающая (с увеличением значения параметра  $X_i$  значение выходного показателя растёт, экстремальная – с максимумом, соответствующим «лучшему» значению выходного показателя, экстремальная – с минимумом, соответствующим «худшему» значению выходного показателя).

Интерпретация зависимостей 1-4:

Зависимость 1. Имеется определенный резерв по улучшению выходного показателя, который может быть реализован за счет увеличения входного параметра до максимальных значений, приведенных в таблице экспериментальных данных. При дальнейшем изучении процесса имеет смысл исследовать область со значениями параметров  $X_i$ , большими, чем имеются в исходном экспериментальном материале.

Зависимость 2. Имеется определенный резерв по улучшению выходного показателя, который может быть реализован за счет уменьшения значений входного параметра до минимальных значений, приведенных в таблице экспериментальных данных. При дальнейшем изучении процесса имеет смысл исследовать область со значениями параметра  $X_i$ , меньшими, чем имеются в исходном экспериментальном материале.

Зависимость 3. Имеется определенный резерв по улучшению выходного показателя, который может быть реализован за счет поддержания значений параметра во втором поддиапазоне. При дальнейшем изучении процесса имеет смысл более подробно исследовать область значений параметра, соответствующую второму поддиапазону. Это позволит выявить возможности дальнейшего повышения эффективности процесса.

Зависимость 4. Технологический процесс по данному параметру работает в области впадины между двумя экстремумами. Поиск оптимальных значений необходимо вести в областях значений соответствующего параметра ниже минимального и выше максимального.

### **3.2. Оценка силы влияния каждого входного параметра $X_i$ на выходной показатель (комплекс выходных показателей)**

Сила параметра  $X_i$  определяется как разность между максимальным и минимальным средними значениями выходного показателя в поддиапазонах.

### **3.3 Оценка резерва «улучшения» выходного показателя (комплекса выходных показателей) по каждому из входных параметров**

Резерв возможного «улучшения» выходного показателя за счёт выбора оптимального диапазона значений параметра  $X_i$  может быть определён как разность между средними значениями выходного показателя в «лучшем» поддиапазоне и во всей таблице исходных данных.

#### **4. Субоптимизация технологического режима.**

Субоптимизация технологического режима осуществляется по модели 1 (см.п.6) путём выбора для каждого параметра того поддиапазона значений, которому соответствует максимальное (минимальное, если выходной показатель необходимо минимизировать) среднее значение выходного показателя.

#### **5. Свойства математических моделей, получаемых с помощью метода восстановления одномерных зависимостей (МВОЗ)**

Модели, полученные с помощью МВОЗ:

- объективны - процедура построения модели полностью формализована – априорная информация экспертов не используется;
- информативны – описывают характер зависимости выходного показателя (комплекса выходных показателей) от каждого из входных параметров изучаемой системы;
- наглядны - формулируются в виде формальных непротиворечивых на данном экспериментальном материале гипотез, легко интерпретируемых на языке соответствующей предметной области;
- не чувствительны к коррелированности параметров, наличию ненаблюдаемых и наблюдаемых, но неизмеряемых параметров;
- конструктивны - позволяют оценить силу влияния каждого входного параметра на выходной показатель (комплекс выходных показателей) и величину резерва по выходному показателю от каждого из входных параметров;
- имеют простые, надёжные и экспрессные методы оптимизации;
- необходимое количество опытов (строк таблицы исходного материала), необходимое для построения модели, не зависит от количества входных параметров.

#### **6. Возможности метода восстановления одномерных зависимостей**

С помощью метода восстановления с минимальными затратами времени и средств решаются следующие задачи:

- построения адекватных и высокоинформативных математических моделей действующих производств в металлургии, химии, нефтепереработке и других отраслях промышленности по информации, фиксируемой в режиме их функционирования;
- субоптимизации технологического режима по заданному критерию (комплексу критериев);
- технологического аудита - оценки резервов изучаемого производства по заданному выходному показателю (комплексу выходных показателей), которые могут быть реализованы за счёт оптимизации технологического режима на существующем оборудовании, с использованием существующих систем информационного обеспечения и управления, т.е. без дополнительных капитальных затрат.
- определения научно и технологически обоснованных требований к неуправляемым параметрам (например, показателям качеств сырья), учитывающих индивидуальность изучаемого процесса.

#### **ВЫВОДЫ**

1. Практически все действующие технологические процессы в металлургии, химии, нефтепереработке, биотехнологии и др. отраслях промышленности работают не в оптимальных режимах и имеют существенные резервы по снижению себестоимости, энерго- и ресурсосбережению, повышению производительности и качества продукции, сокращению количества отходов производства и другим показателям.

2. Неоптимальность функционирования действующих производств объясняется в первую очередь отсутствием корректных формальных методов идентификации действующих производств.

3. Для решения задачи существенного и практически беззатратного повышения эффективности работы действующих производств разработан новый метод идентификации (метод восстановления одномерных зависимостей) с помощью которого решаются следующие задачи:

- формального выбора минимально необходимого и достаточного перечня входных параметров;
- корректной формализованной свёртки множества выходных показателей в обобщённый критерий оценки качества функционирования изучаемого технологического процесса;
- построения математической модели на основании информации, фиксируемой в режиме нормальной эксплуатации изучаемого технологического процесса;
- субоптимизации технологического режима - определения условий проведения процесса, которые могут быть реализованы на существующем оборудовании, с помощью существующих систем информационного обеспечения и управления (т.е. без дополнительных капитальных затрат);
- оценка резервов производства, которые могут быть реализованы за счёт оптимизации технологического режима;

4. Практическое использование метода восстановления одномерных зависимостей для изучения и совершенствования действующих технологических процессов в химии, металлургии, нефтепереработке, биотехнологии и других отраслях промышленности позволит повысить качество продуктов, сократить расходные нормы по сырьевым и энергетическим ресурсам, сократить количество отходов производства, увеличить выход продукта и снизить его себестоимость.

- 1) П. Эйхгофф. Оценка параметров и структурная идентификация. (Обзор). //Автоматика. –1987. - №6. С. 21-38.
- 2) Давиденко А.М., Кац М.Д. Новые методы изучения и совершенствования действующих производств и их возможности. //Восточно-Европейский журнал передовых технологий. - 2004. - №6. - С.189-193.
- 3) Кац М.Д., Давиденко А.М. Математическое моделирование и оптимизация технологического режима доменной плавки по информации, фиксируемой в режиме нормальной эксплуатации. // Металлургическая и горнорудная промышленность. - 2007. №3. – С. 15-20.

## МОДИФИЦИРОВАННАЯ ПРОЦЕДУРА УСТАНОВЛЕНИЯ КОРРЕЛЯЦИИ IN VITRO – IN VIVO ДЛЯ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПРЕПАРАТОВ

Кондратов С.А., Потапенко Э.В., Савяк Р.П., \*Тимко В.Г.

Институт химических технологий ВНУ им. В.Даля, kondratov@rune.lg.ua

\*Научно-производственная фирма «Микрохим»

В современной фармакологии при установлении биоэквивалентности референтных и генерических препаратов все большее значение приобретают методы математического моделирования, основанные на установлении корреляции между профилями растворения препаратов *in vitro* и его абсорбцией *in vivo* (IVIVC). Один из наиболее популярных методов для установления такой корреляции является метод свертки (конволюции), основанный на представлении изменения концентрации препарата в плазме крови  $C(t)$ ,  $нг \cdot мл^{-1}$ , в виде интеграла свертки [1]:

$$C(t) = \int_0^t C_{\delta}(t - \tau) \cdot F(\tau) d\tau, \quad (1)$$

где  $C_{\delta}$  - импульсная функция отклика на введение препарата,  $F$  – скорость абсорбции препарата организмом,  $нг \cdot мл^{-1} \cdot час^{-1}$ .

Значения функции  $F$  находят численным решением интегрального уравнения (1) при заданных значениях  $C(t)$  и  $C_{\delta}$  в одних и тех же временных точках, после чего устанавливают